

рис. 2 – Отнормированная на максимум зависимость от времени

Как видно из рис. 2, величина максимума поглощения первого образца не меняется со временем, в то время как спад интенсивности поглощения второго образца хорошо описывается экспоненциальным спадом с постоянной времени 9 мин.

Таким образом, показано, что наличие ионов Na^+ в растворе содержащем КТ, приводит к уменьшению высоты потенциального барьера, препятствующего спонтанной агрегации наночастиц, и формированию структур из наночастиц, за счет уменьшения электростатического отталкивания между ними.

Список публикаций:

- [1]. Wang T., LaMontagne D., Lynch J., Zhuang J. and Cao Y. C. Colloidal superparticles from nanoparticle assembly. *Chem. Soc. Rev.*, 2013. v. 42. p. 2804.
- [2]. Jia G., Sitt A., Hitin G.B., Hadar I., Bekenstein Y., Amit Y., Popov I. and Banin U. Couples of colloidal semiconductor nanorods formed by self-limited assembly. *Nature Materials*, 2014. v. 13. p. 301-307.
- [3]. Слабко В.В., Хачатрян Г.Г., Александровский А.С. Управляемая внешним световым полем самоорганизованная агрегация малых металлических частиц. *Письма в ЖЭТФ*, 2006. Т.84. вып.6. с. 360-365.
- [4]. Slabko V.V., Tsipotan A.S., Aleksandrovsky A.S. Resonant light-controlled self-assembly of ordered nanostructures. *Photonics and Nanostructures – Fundamentals and Applications*, 2012. v. 10. p. 636-643.
- [5]. Slabko V.V., Tsipotan A.S., Aleksandrovsky A.S., Slyusareva E.A. Dynamics of self-organized aggregation of resonant nanoparticles in a laser field. *Appl. Phys. B.*, 2014. v. 117. p. 271-278.
- [6]. Kulvietis V., Streckyte G., Rotomskis R. Spectroscopic investigations of CdTe quantum dot stability in different aqueous media. *Lith. J. Phys.*, 2011. v. 51. n. 2. p. 163-171.

Структура редкоземельных примесных центров R^{3+} в $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$

Сердцев Александр Вячеславович

Чернышев Владимир Артурович

Уральский федеральный университет имени первого Президента России Б.Н. Ельцина

Чернышев Владимир Артурович

saxara1994@yandex.ru

Кристаллы $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ (YAG), активированные редкоземельными ионами, привлекают внимание исследователей как перспективные лазерные материалы [1]. Кристаллическое поле на примесном ионе в существенной степени определяется его ближайшим окружением – лигандами и следующими за ними ионами. Для исследования электронного спектра примесных центров необходима информация об их локальной кристаллической структуре.

В работе проводится моделирование кристаллической структуры примесных центров R^{3+} в $\text{Y}_3\text{Al}_5\text{O}_{12}$ из «первых принципов», в рамках МО ЛКАО подхода, теории функционала плотности с использованием гибридного функционала B3PW.

Ab initio расчеты были проведены в программе CRYSTAL [2], предназначенной для моделирования периодических структур.

Расчеты предсказывают, что искажение кристаллической решетки в примесных центрах R^{3+} в основном локализовано в пределах двух координационных сфер. Замещение иттрия ионом R^{3+} ($R = \text{La} - \text{Ho}$) приводит к расширению 1-2 координационных сфер в пределах 0.1 Å и снижается от лантана к гольмию (изменение длин связей с лигандами составляет менее 5%). При замещении иттрия изовалентным ионом эрбия искажение практически отсутствует. В случае замещения ионом R^{3+} ($R = \text{Tm} - \text{Lu}$), расчеты предсказывают сжатие первых двух координационных сфер в пределах 0.02 Å, увеличивающееся от тулия к лютецию.

Результаты могут быть использованы для интерпретации экспериментальных данных и предсказания свойств лазерных материалов YAG:R^{3+} .

Работа выполнена при поддержке Министерства образования и науки РФ (проект № 3.9534.2017/БЧ), Российского научного фонда (проект № 16-33-00437_мол_а) и стипендии УрФУ за достижения в научной деятельности.

Список публикаций:

[1] M. Kienel, et al., *Opt. Lett.* 39, 3278 (2014).

[2] R. Dovesi, et al., *Int. J. Quantum Chem.* 114, 1287 (2014).

Исследование спектра высокого разрешения молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в диапазоне 1550 – 1950 cm^{-1}

Чжан Фанцэ

Национальный исследовательский Томский политехнический университет

Улеников Олег Николаевич, д.ф.-м.н.

1946529618@qq.com

Диоксид серы – одно из важнейших химических соединений, которое используется в научных исследованиях в таких областях как химия, астрофизика, лазерная физика и т.д. Исследование спектров высокого разрешения диоксида серы имеет важное значение для планетологии, в частности, физики и химии атмосферы Венеры, где содержание двуокиси серы в миллионы раз выше, чем в земной атмосфере [1]. Как следствие, в течение многих лет проводятся спектроскопические исследования данной молекулы в микроволновой, субмиллиметровой и инфракрасной областях.

В данном исследовании экспериментальные спектры высокого разрешения были зарегистрированы на ИК-Фурье спектрометре Bruker IFS120HR при температуре 298.15 К с разрешением между 0,0034 cm^{-1} (в 1500 cm^{-1}) и 0.0040 cm^{-1} (в 2000 cm^{-1}) при разных давлениях и эффективных длинах оптической пути 5 Па, 450 Па и 4 метра, 24 метра. Полученный в результате экспериментальной регистрации спектр в диапазоне 1550 – 1950 cm^{-1} показан на рис. 1.

Молекула $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ является молекулой типа асимметричного волчка с величиной параметра асимметрии $k = (2B - A - C)/(A - C) \cong -0.945$, и группа симметрии данной молекулы изоморфна точечной группе симметрии C_s [2]. Правила отбора в данной молекуле: $\Delta J = 0, \pm 1$ и $\Delta K_a = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \dots$, $\Delta K_c = \pm 1, \pm 3, \dots$ для любой полосы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$.

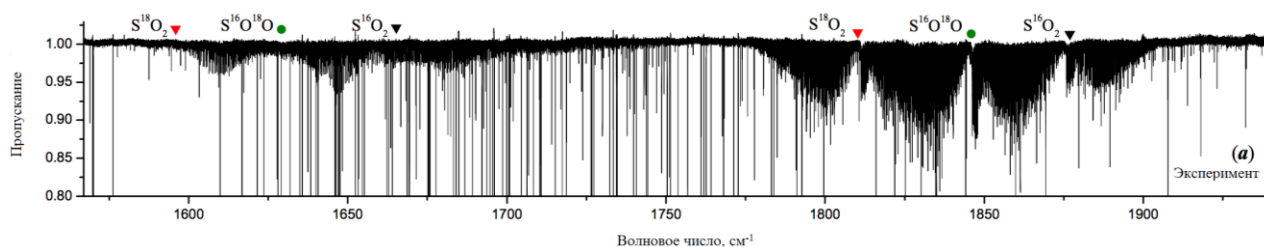


рис.1. Экспериментально зарегистрированный спектр молекулы $^{32}\text{S}^{16}\text{O}^{18}\text{O}$ в диапазоне 1550 – 1950 cm^{-1}

Для анализа экспериментальных данных была использована модель эффективного гамильтониана, который учитывает наличие резонансных взаимодействий и имеет следующий вид [3]:

$$H^{\text{vib.-rot.}} = \sum_{v, \tilde{v}} |v\rangle \langle \tilde{v}| H^{v, \tilde{v}} \quad (1)$$

Диагональные блоки гамильтониана в данном выражении, описывающие вращательную структуру невозмущённых колебательных состояний, имеют вид оператора Уотсона [4]: